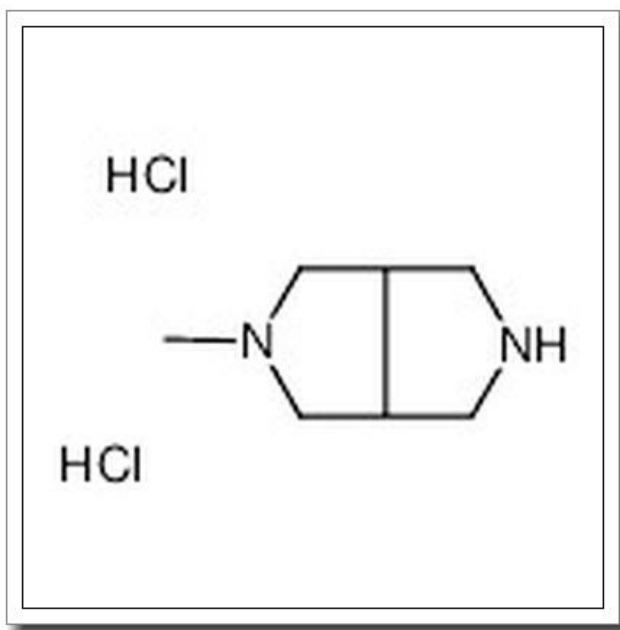


5-methyl-2,3,3a,4,6,6a-hexahydro-1H-pyrrolo[3,4-c]pyrrole,dihydrochloride

5-methyl-2,3,3a,4,6,6a-hexahydro-1H-pyrrolo[3,4-c]pyrrole, dihydrochloride



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-methyl-2,3,3a,4,6,6a-hexahydro-1H-pyrrolo[3,4-c]pyrrole, dihydrochloride
中文名称	5-methyl-2,3,3a,4,6,6a-hexahydro-1H-pyrrolo[3,4-c]pyrrole, dihydrochloride
CAS 号	1187927-43-0
分子式	C ₇ H ₁₆ Cl ₂ N ₂
分子量	199.121
纯度	>96%

产品说明

5-甲基-2, 3, 3a, 4, 6, 6a-六氢-1H-吡咯并[3, 4-c]吡咯二盐酸盐产品说明书

1. 产品概述与化学特性

本产品为白色至类白色结晶性粉末，化学名称为 5-methyl-2, 3, 3a, 4, 6, 6a-hexahydro-1H-pyrrolo[3, 4-c]pyrrole, dihydrochloride, CAS 号 1187927-43-0, 分子式 C₇H₁₆Cl₂N₂, 分子量 199. 121。其纯度经高效液相色谱 (HPLC) 验证大于 96%，结构中的双吡咯烷骨架赋予其独特的刚性构象和碱性特性，二盐酸盐形式显著提升了水溶性与稳定性。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物作为含氮杂环衍生物，可通过质子化作用参与氢键网络形成，在分子识别和酶抑制中表现活跃。其结构特征使其成为构建药物活性分子的关键中间体，尤其在调节神经递质受体（如多巴胺、5-HT）或离子通道蛋白方面具有潜在应用价值。

3. 主要应用领域与具体用途

主要应用于医药研发领域：

- 3.1 作为中枢神经系统药物（如抗抑郁剂、抗精神病药）的合成前体
- 3.2 用于构建靶向 GPCR（G 蛋白偶联受体）的小分子抑制剂
- 3.3 在不对称催化反应中作为手性配体的核心骨架
- 3.4 实验室级生化研究中用于探索杂环化合物的构效关系

4. 储存条件与使用建议

储存于密闭容器中，避光防潮，建议温度 -20° C 长期保存，短期使用可置于 2-8° C 干燥环境。溶解时优先选用去离子水或生理盐水缓冲体系，避免与强氧化剂接触。实验操作需在通风橱中进行，推荐使用丁腈手套及护目镜。

5. 质量控制与安全信息

批次产品均通过核磁共振 (1H NMR)、质谱 (MS) 及元素分析 (EA) 验证结构，残留溶剂符合 ICH Q3C 标准。安全数据：急性毒性 (LD50 大鼠口服) >500 mg/kg,

皮肤刺激性类别 3。如接触眼睛应立即用大量清水冲洗 15 分钟并就医。废弃物处置需符合当地危险化学品管理法规。

本产品仅限科研用途，不适用于诊断或治疗人类疾病。